

Табела 5.2. Спецификација предмета

Студијски програм: Основне академске студије Физичка хемија			
Назив предмета: Примена рачунара у физичкој хемији			
Наставник: Мојовић Милош			
Статус предмета: Обавезни			
Број ЕСПБ: 6			
Услов: За упис предмета потребно је уписати све неположене предмете из I и II студијске године. За полагање испита потребно је положити све испите из I студијске године.			
Циљ предмета: Теоријско и практично упознавање са процесом примене рачунара у решавању физикохемијских проблема, симулацијама и моделовању физикохемијских система.			
Исход предмета: Студент зна да препозна и дефинише начин за решавање физикохемијских проблема путем рачунара. Студент је способен да осмисли, конструише, направи и изврши рачунарски програм за симулације различитих типова физикохемијских процеса. Студент је способен да ефикасно користи рачунарске базе података као и различите софтверске пакете намењене за решавање физикохемијских проблема. Студент је способен да повеже рачунар са мерним уређајем и сам направи жељени аквизициони софтвер за аутоматизацију мерења.			
Садржај предмета <i>Теоријска настава</i> Рачунарски харвер - основе и принцип рада електронских компоненти рачунара. Рачунарски софтвер - оперативни системи и апликативни софтвер. Рачунарска мрежа и мрежни параметри. Научни сервиси и базе података. Увод у рачунарске симулације: модел, прототип, валидација модела. Основни типови симулација и њихова примена за решавање физикохемијских проблема. Препознавање физикохемијског проблема и његово представљање у математичком контексту. Основе програмирања на програмској платформи MATLAB. Решавање физикохемијских и математичких проблема употребом савремених софтверских пакета: класично и визуелно програмирање, графичка презентација података, научна визуализација и молекулска графика. АД и ДА претварачи. Сензори - типови и примена у физикохемијским истраживањима. Повезивање рачунара и мерног инструмента, креирање аквизиционог софтвера, аквизиција података. Аутоматизација мерења и обраде експерименталних резултата. <i>Практична настава</i> Рад на рачунару - програмирање. Конектовање рачунара и мерног инструмента - аквизиција података.			
Литература 1. Милош Мојовић, Рачунарство и информатика за студенте физичке хемије са применама у биофизичкој хемији, Факултет за физичку хемију (2020). 2. A. Yadin, Computer systems architecture, CRC Press - Taylor & Francis Group (2016). 3. M. M. Woolfson & G. J. Pert, An introduction to computer simulation, Oxford University Press (1999). 4. E. E. Mikhailov, Programming with MATLAB for scientists: A beginner's introduction, CRC Press - Taylor & Francis Group (2017).			
Број часова активне наставе	Теоријска настава: 2	Практична настава: 2	
Методe извођења наставе Интерактивна предавања и практичне вежбе уз коришћење рачунара.			
Оцена знања (максимални број поена 100)			
Предиспитне обавезе	поена	Завршни испит	поена
активност у току предавања	10	писмени испит	30
практична настава	20	усмени испит	30
колоквијум-и			
семинар-и	10		